

«Основы спектроскопии ЭПР для химиков»

(составитель – проф. В.И. Фельдман).

Аннотация

Краткий курс состоит из 6 лекций и 2 семинаров. В курсе последовательно излагаются физические основы спектроскопии электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), принципы регистрации сигналов ЭПР, представления о сверхтонком взаимодействии, интерпретация спектров ЭПР свободных радикалов, основы теории ширины линии и природа динамических эффектов в спектрах ЭПР. В качестве иллюстрации рассматриваются, в первую очередь, спектры ЭПР органических радикалов и ион-радикалов. Кратко излагаются методические вопросы, особенности постановки эксперимента и проблемы количественного анализа спектров ЭПР. В заключение дается обзор применений метода ЭПР в различных областях химии, а также понятие о методах спинового зонда и спиновых меток.

Семинары посвящены проблемам практической интерпретации и моделирования изотропных спектров ЭПР (с решением задач).

Курс рассчитан на студентов-химиков различных специализаций, но может быть особенно полезен студентам, специализирующимся в области химической кинетики, химии высоких энергий, физической органической химии, химии высокомолекулярных соединений, биохимии, а также электрохимии и аналитической химии. Предполагается знание элементарной физики и основ математического анализа в объеме общего курса.

Программа курса

Лекция 1. Физические основы спектроскопии ЭПР. Магнитный диполь во внешнем поле. Квантование магнитного момента. Эффект Зеемана. Основное уравнение ЭПР. Понятие о g -факторе.

Лекция 2. Общие принципы регистрации сигналов ЭПР. Устройство современных спектрометров ЭПР. Обоснованный выбор параметров регистрации. Чувствительность и информативность спектроскопии ЭПР. Определение абсолютного количества и концентрации парамагнитных центров из спектров ЭПР.

Лекция 3. Тонкое и сверхтонкое взаимодействие. Природа сверхтонкого взаимодействия (СТВ) и его проявление в спектрах ЭПР. Основы анализа сверхтонкой структуры спектров ЭПР свободных радикалов; иллюстративные примеры.

Семинар 1. Интерпретация изотропных спектров ЭПР индивидуальных радикалов в жидкой фазе.

Лекция 4. Спектры ЭПР сложных органических радикалов и макрорадикалов. Связь констант СТВ с электронной структурой и геометрией радикала. Определение конформации радикалов из спектров ЭПР. Анизотропия СТВ; общие представления об анализе анизотропных спектров ЭПР.

Семинар 2. Интерпретация сложных спектров ЭПР. Моделирование спектров ЭПР и сопоставление с экспериментом

Лекция 5. Элементарная теория ширины линии в спектрах ЭПР. Однородное и неоднородное уширение. Спин-решеточная и спин-спиновая релаксация. Эффекты насыщения. Проявления динамических эффектов в спектрах ЭПР и их качественная интерпретация.

Лекция 6. Дополнительная информация, заключенная в спектрах ЭПР. Влияние пространственного распределения парамагнитных частиц на спектры ЭПР; радикальные пары. Спиновые метки и спиновые зонды. Обзор применений метода ЭПР в различных областях химии, биологии и медицины.